



A study of matter-antimatter compounds: spontaneous rearrangement in anti-hydride molecules

著者	山下 琢磨
号	84
学位授与機関	Tohoku University
学位授与番号	理博第3213号
URL	http://hdl.handle.net/10097/00125461

論文内容要旨

(NO. 1)

氏 名	山下琢磨	提出年	平成30年
学位論文の 題 目	A study of matter-antimatter compounds: spontaneous rearrangement in anti-hydride molecules (物質・反物質化合物の研究:反水素化分子における自発転位)		

論文目次

Chapter 1 Introduction

Chapter 2 Theory

Chapter 3 Positronic atoms

Chapter 4 Hydrogen anti-hydride molecule

Chapter 5 Positronium anti-hydride molecule

Chapter 6 Summary and Outlook

Appendix A Supplemental tables for positronic atoms

Appendix B Spin-orbit interaction in positronic alkali atom

Appendix C Probability density function for positronium anti-hydride

Appendix D Non-adiabatic 4-body scattering calculation

Appendix E Computational methods for generalized eigenvalue problem

References

Chapter 1 Introduction

反物質の最小単位は、電子の反粒子である陽電子と、核子の反粒子である反核子からなる反原子核で構成される反原子である。反水素原子は、反陽子と陽電子の束縛状態であり、最も基本的な反原子（反物質）の一つである。反陽子は高エネルギーイオン衝突によって対生成するが、これを減速し、陽電子と反応させて反水素原子を多量に合成することが、最近可能になった。これにより、素粒子物理学の基礎理論検証だけでなく、物質と反物質の多体相互作用を扱う物質・反物質化学の展開が現実味を帯びてきた。物質と反物質が混合すると、物質が持っていた多体の電氣的秩序が別の秩序へ変化し、新奇な化合物や多様な化学反応、物質系では現れにくい量子効果の増幅などが期待できる。

反水素原子と原子の相互作用は、陽電子と原子の相互作用、反陽子と原子の相互作用の両面を持つ。本論文では、陽電子と原子が化合した陽電子原子の研究と、反陽子と水素原子の共鳴状態の研究を基盤に、反水素原子と水素原子の化合物である反水素化水素分子の研究を行い、新奇な分子共鳴状態を预言した。また、反水素原子を利用した化学反応研究に向けた第一原理計算法の開発を行った。

物質・反物質化合物では、反原子と原子だけでなく、電子と陽電子、原子核と反原子核がそれぞれの引力により結合する。これらの結合は、全く異なるエネルギースケールで生じ、化合物の構造だけでなく、化合物の静的な安定性にも大きな影響を与える。本論文では、物質・反物質化合物内で起こる複数の結合組替過程と分子構造・分子内反応性を統一的に理解・議論する一つの試みとして、化合物の中で

自発的な原子 (団) の移動を伴う分子構造変化を表現する「自発転位」の考え方を敷衍した。粒子と反粒子の結合に駆動される微視的な自発転位を基軸に、反水素化分子とその類似系・部分系の構造・性質・分子内反応性を議論した。

Chapter 2 Theory

少数多体系の理論計算に関する基礎的な理論と方法を概説した。特に、束縛状態・散乱状態の理論の枠組みを述べ、レイリー・リッツの変分法に基づく束縛状態計算や複素回転法による共鳴状態計算を解説した。また、本論文の主軸となる計算法であるガウス関数展開法について、基底関数系を複数の座標系で展開されたガウス関数と球面調和関数積によって構築すること、シュレーディンガー方程式を一般化固有値問題に帰着して解くこと、無限小変異ガウスローブ法により四粒子系の行列要素評価が容易になることなどを示した。

Chapter 3 Positronic atoms

陽電子と原子の間には誘起分極による引力が働く。陽電子と原子が結合した陽電子原子では、陽電子は原子核との斥力により原子内部に侵入できず、原子の外縁に広がった分布をとる。価電子の束縛エネルギーが、電子と陽電子の結合状態であるポジトロニウム (Ps ; 電子と陽電子が作る原子) より小さい場合には、価電子は陽電子に移行し、残されたイオンと Ps の間で結合を作る。本論文では、陽電子アルカリ原子弱束縛状態における相対論効果と陽電子原子の双極子系列に属する共鳴状態の結合チャンネルの分析を行った。

リチウム原子とナトリウム原子は陽電子と弱く結合した束縛状態をつくるが、その構造は主に Ps とイオンの結合と解釈できる。一方で、 Ps の電子が原子核へ自発転位する効果が結合機構や粒子間確率振幅に反映されていることも指摘されていた。本研究の結果として、陽電子アルカリ原子弱束縛状態の束縛エネルギーが相対論効果の影響を大きく受けていることが明らかになった。この現象が、陽電子が価電子の電荷を遠方で遮蔽することと、電子が原子核への自発転位によって相対論効果由来の束縛エネルギーを獲得することの二つの機構に支えられていることを指摘した。

本論文では次に、 Ps の励起状態とイオンが作る共鳴状態の系列 (双極子系列) がどのような原子軌道との関係するかについて三粒子模型を用いて分析した。励起 Ps は異なる角運動量の状態が縮退しているために、イオンの電場下で永久双極子モーメントを獲得し、二体近似で解析的に予想される多数の共鳴状態を生じる。本研究では、励起 Ps とイオンの距離が近い共鳴状態では、電子がイオンに転位した構造が主になり、解析的な規則から外れること、これに伴い共鳴寿命が大きく変化することを示した。この結果は、双極子系列が複数の原子軌道と関係していること、すなわち双極子系列の共鳴状態のエネルギー・安定性を理解する上で電子の自発転移が重要であることを示した。

Chapter 4 Hydrogen anti-hydride molecule

反水素化水素分子は、水素原子と反水素原子の輻射結合による反応によって生成する可能性が指摘されている。原子間相互作用は遠方で水素原子間と同じ分散引力であり、結合に寄与する可能性がある。一方でこの分子は、 Ps とプロトニウム (Pn ; 陽子と反陽子が作る原子) へ自動的に解離する過程を持ち、共鳴状態として有限の寿命を持つことが予想される。 Ps と Pn の量子状態の組み合わせに対応する多くの異なる自動解離状態と結合した分子共鳴状態を予言することは従来難しく、これまでの多くの先

行研究では水素分子と同様に量子化学で用いられる断熱近似（核の運動と電子の運動を分離して解く方法）による分析がなされてきた。しかし、核間運動が加速的な反水素化水素分子において断熱近似は適さず、共鳴状態の解離寿命を計算できないという根本的な問題があった。

本研究では、反水素化水素分子を構成する四粒子系の基礎方程式を従来の近似を用いずに解くことに成功した。ガウス関数展開法を用いて分子型の結合と解離後の構造を反映した P_n と P_s の結合、およびその中間的な構造を含めて波動関数を記述し、複素回転法により共鳴状態のエネルギー・幅を計算した。従来の断熱近似では分子型の結合が組み変わって解離する過程が含まれず、無限の寿命を与えていたのに対し、本研究では解離に対する安定性を含めて有限の寿命を予言した。これらの結果は、副系の反陽子水素原子においても同様の計算法を用いて検証した。解離に寄与する分子内での自発転位は、静的な共鳴状態の構造として粒子間の動径波動関数にも現れていることが明らかになった。陽子と反陽子間の確率振幅は近距離で、断熱近似で予言できない特徴的な振る舞いを示すことがわかり、動的な解離と静的な分子構造の両面で自発転位の理解が重要であることを示した。また、陽子と反陽子間の核力と対消滅の効果を現象論的に取り込んだ分析を行い、共鳴エネルギーがクーロン力のみによる予言から変化することを示した。

Chapter 5 Positronium anti-hydride molecule

反水素正イオンは、反陽子と二つの陽電子が結合した系で、水素負イオンの反物質である。反水素正イオンを加速・減速したのちに陽電子を剥ぎ取れば、エネルギー選択的な反水素原子ビームや物質・反物質間重力の検証実験に利用可能な極低温反水素原子に応用できる。反水素正イオンを効率的に生成する反応として反水素原子と P_s の化学反応が期待されている。

本研究では、精密な化学反応計算を目指し、各量子状態間の化学反応断面積を計算する方法を開発した。この過程で、反水素化 P_s 束縛状態の構造に関する詳細な分析を行い、分子と原子の両方の側面を併せ持つことを見出した。特に、分子としての結合機構における高次の効果の寄与が反水素分子におけるそれと定性的に異なることや、原子としての結合機構において反陽子から見た二つの陽電子の相関がそのなす角に応じて異なる描像を示すことなどを指摘した。

束縛状態計算を拡張して、反水素原子と P_s が衝突の中間状態である分子共鳴状態を経て解離する過程へ計算を進めた。この反応のように、反応中に粒子組替が起きる場合には、緊密結合法のような従来の反応計算法で収束・精度が悪くなるという問題があったが、本研究では、反応の中間状態をあらわに取り入れた計算により、この問題を解決した。反水素原子と P_s の結合から反水素正イオンと電子の結合へ自発転位によって組み替わることで、この中間状態がどの量子状態へ解離するかを初めて明らかにした。

Chapter 6 Summary and Outlook

本論文では、物質反物質化合物の雛型である反水素化水素分子とその副系・類似系である陽電子原子、反陽子水素原子、反水素化 P_s 分子について第一原理計算から研究を行った。さらに、将来の反水素原子化学に有用な反水素イオン合成過程について研究を行い、精密な状態間化学反応を計算できる枠組みとコード開発を行い、反水素化 P_s 共鳴状態の解離過程の計算に応用した。一連の研究を通して、物質・反物質化学を開拓するにあたり、粒子・反粒子結合によって引き起こされる分子内自発転位が、物質・反物質化合物のエネルギーや構造だけでなく、自動解離に対する安定性や化学反応性を統一的に理解す

る上で重要であることを示した。

物質・反物質化合物では、通常大きな系で発現するような自発転位が、精密な理論計算が可能なほど小さな系でも顕著な現象として発現する。すなわち、物質・反物質化合物の研究は、大きな分子での化学結合の組替、半導体などでの電子・正孔相互作用、金属中での原子・格子欠陥相互作用、放射線照射化でのラジカル反応や、DNA への影響が議論されている原子間クーロン脱励起など、様々な分野で、これまでと全く異なる視点から議論する枠組みを提供でき、物質・反物質化合物を軸とした本研究の精密計算は、化学や境界領域研究への新たな展開が期待できる。

論文審査の結果の要旨

反水素原子は、陽子の反粒子である反陽子と陽電子の束縛状態であり、最も基本的な反物質の一つである。最近、高エネルギー原子核反応によって対生成した反陽子を減速し、陽電子と反応させて超低速の反水素原子を大量に合成できるようになり、反水素原子が基礎化学研究の対象となってきた。本論文は、物質と反物質の接点における新奇な化学を予見すると同時に、これまで積み上げられてきた化学の理解を、物質と反物質の相互作用から再構築する革新的な研究をまとめたものである。また、ここで開発された理論は系の構成粒子に依存する近似を含まない手法であり、汎用性が高く幅広い分野に応用可能である。

第 1 章では、超低速の反水素原子生成の実験と理論研究の現状について概観し、本論文の主題を導く過程について記述した。物質・反物質化合物では、反原子核・陽電子間、原子核・電子間に加え、電子・陽電子間、原子核・反原子核間にも引力が働き、化合物内で粒子配置の組替えが自発的に起こり（ここでは自発転位とよぶ）、電子と陽電子、原子核と反原子核が結合することが物質・反物質化合物の安定性を理解する鍵であり、これを検証するための研究方針（第 3 章～5 章）を記述した。

第 2 章では、物質・反物質化合物の安定性を厳密に取扱うための量子化学および計算化学の理論を網羅的に記述した。

第 3 章では、物質・反物質化合物の部分系である陽電子原子の安定性について詳細に分析した。主な成果として、1) ポジトロニウム (Ps ; 電子と陽電子が作る原子) とイオンが弱束縛状態を作る陽電子アルカリ原子では、電子が原子核に自発転位することができ、これにより束縛エネルギーに対する相対論効果の寄与が通常の原子系に比べて軽原子番号でも大きくなること、2) Ps の励起状態とイオンが作る共鳴状態の系列（双極子系列）において、陽電子と結合を作っている電子のイオンへの自発転位の起こりやすさが共鳴系列の発現位置を左右することを明らかにした。

第 4 章では、物質・反物質化合物である反水素化水素分子の安定性について、もう一方の部分系である反陽子化水素イオンと対比しながら、詳細に分析を行った。陽子と反陽子の運動を系全体の運動から除外する断熱近似に立脚した従来の理論の枠組みでは、反水素化水素分子やイオンの安定性を定量的に議論することは原理的に不可能だった。本研究では、反水素化水素分子を構成する四粒子の基礎方程式を、断熱近似を用いず厳密に計算することに成功した。分子内部での自発転位による粒子配置の変化を全て記述できる様に複数の座標系を導入することで、共鳴幅（解離寿命）を含めて反水素化水素分子の共鳴エネルギーを予言することができた。また、この自発転位の影響が終状態の動径波動関数に現れていることを見出し、自発転位による解離機構について詳細な理解を得た。陽子・反陽子間の核力・対消滅の効果を現象論的に取り込んだ分析を行い、共鳴エネルギーがクーロン力のみによる予言から変化することを具体的に示した。 10^{-15} m の領域で働く核子・反核子間の相互作用が、 10^{-10} m の原子・分子のスケールまで影響が及ぶことは大きな驚きであったが、量子力学的な考察により確認された。

第 5 章では、物質・反物質化合物の反応を量子力学的散乱問題としてとらえ、反応前後の各量子状態間の遷移を厳密に計算する方法を開発した。3 粒子系の厳密計算はこれまでもあったが、4 粒子系の計算はほとんど行われていない。4 粒子系への拡張は、内部構造をもつもの同士の散乱や、部分系が共鳴状態（準安定状態）となる散乱など取り扱える系が格段に広がり、今後の発展が期待される重要な成果である。ここでは、低速反水素ビーム開発のため理論計算が切望されている反水素原子とポジトロニウムの反応による反水素正イオン生成断面積の計算を行った。ここでも、散乱の中間状態での自発転位によって、反水素原子とポジトロニウムの結合から反水素正イオンと電子の結合への組替えわたることが、遷移断面積に影響を及ぼすことを明らかにした。

第 6 章では、本論文の総括と今後の展開について検討した。

以上の研究は、自立して研究活動を行うに必要な高度の研究能力と学識を有することを示している。したがって、山下琢磨提出の博士論文は、博士（理学）の学位論文として合格と認める。